

Tổng quan ứng dụng các phương pháp dược lý hiện đại trong nghiên cứu tính vị quy kinh của các vị thuốc y học cổ truyền

Huỳnh Thị Lưu Kim Hương^{1,*}, Võ Thanh Hóa^{2,3}

¹Khoa Dược, Trường Đại học Nguyễn Tất Thành, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

²Trung tâm Nghiên cứu và Phát triển sản phẩm chăm sóc sức khỏe Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh

³Trường Đại học Khoa học Sức khỏe, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

*htlkhuong@ntt.edu.vn; vthoa@uhsvnu.edu.vn

Tóm tắt

Tính, vị, quy kinh là những yếu tố quan trọng quyết định việc chọn lựa và kết hợp các vị thuốc nhằm đạt hiệu quả điều trị tối ưu trong y học cổ truyền. Hiện nay, việc ứng dụng các phương pháp dược lý hiện đại trong nghiên cứu về tính, vị, quy kinh của dược liệu còn nhiều hạn chế. Do đó, nhằm cung cấp một góc nhìn toàn diện về khả năng ứng dụng và ưu, nhược điểm của một số phương pháp dược lý phổ biến, nghiên cứu đã tổng hợp nhiều công trình sử dụng các phương pháp dược lý mới trong giai đoạn 2015-2025 để phân tích: phạm vi áp dụng, ưu điểm, nhược điểm và các yếu tố ảnh hưởng. Kết quả cho thấy, các phương pháp dược lý này đã góp phần quan trọng trong việc chuyển đổi ứng dụng thuốc y học cổ truyền từ kinh nghiệm dân gian sang cơ sở khoa học, đặc biệt là phương pháp dược lý mạng và mạng neuron lan truyền ngược. Nghiên cứu góp phần làm tài liệu tham khảo hữu ích, giúp các nhà nghiên cứu lựa chọn phương pháp phù hợp trong các nghiên cứu liên quan đến thuốc y học cổ truyền, đồng thời hỗ trợ các bác sĩ lâm sàng có thêm cơ sở khoa học về việc kê đơn thuốc y học cổ truyền cho người bệnh.

© 2026 Journal of Science and Technology - NTTU

Nhận 08/03/2026

Được duyệt 07/05/2026

Công bố 28/05/2026

Từ khóa

Thuốc y học cổ truyền; tính; vị; quy kinh; mạng neuron lan truyền ngược; dược lý mạng.

1 Đặt vấn đề

Từ xưa, thuốc Y học cổ truyền (YHCT) đã được sử dụng rất rộng rãi và hiệu quả điều trị đã được ghi chép lại trong các y văn cổ. Các học thuyết như Tạng tượng, Kinh lạc, Ngũ hành, Thiên – Nhân hợp nhất đã trở thành nền tảng cho thực hành điều trị bệnh YHCT. Theo lý luận YHCT, sự mất cân bằng Âm – Dương trong cơ thể là vấn đề cốt lõi mà bệnh được hình thành. Do đó, mục đích điều trị là thiết lập lại cân bằng Âm – Dương vốn có của cơ thể. Các đặc tính cơ bản của thuốc YHCT gồm: “tứ tính”, “ngũ vị” và “quy kinh” đóng vai

trò quan trọng trong việc chọn lựa và kết hợp các vị thuốc nhằm đưa thuốc đến “đích”, cụ thể là tạng phủ rối loạn chức năng hay vùng cơ thể bị bệnh. Ứng dụng các công nghệ, khoa học kỹ thuật và các phương pháp hiện đại trong nghiên cứu y sinh đã thúc đẩy việc sử dụng thuốc YHCT hiện đại hóa hơn và có bằng chứng khoa học hơn chứ không đơn thuần chỉ dựa vào kinh nghiệm và các lý luận triết học [1]. Mặc dù vậy, cơ chế tác động của thuốc YHCT ở mức độ phân tử phân lớn vẫn chưa được hiểu rõ, còn khá nhiều vị thuốc mà đặc tính hay thành phần hóa học (TPHH) vẫn đang còn được nghiên cứu, đặc biệt là các vị thuốc hiếm. Vì thế,

việc ứng dụng các nghiên cứu Dược lý học Y học hiện đại (YHHĐ) để tìm hiểu sâu về thuộc tính của thuốc YHCT sẽ góp phần làm sáng tỏ tác động của dược liệu đối với cơ thể con người.

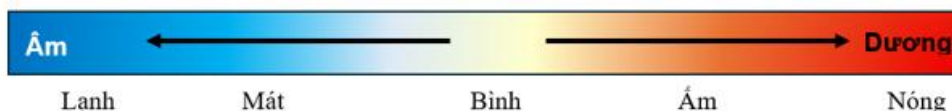
Xuất phát từ thực tiễn trên, nhằm mang lại một cái nhìn tổng quan về việc ứng dụng các phương pháp Dược lý học hiện đại trong nghiên cứu về thuộc tính của thuốc YHCT, nhóm tác giả đã tìm kiếm và tổng hợp một số phương pháp đang được ứng dụng gần đây từ các nghiên cứu trên thế giới. Nghiên cứu góp phần vào sự

phát triển của các nghiên cứu khoa học về thuốc YHCT tại Việt Nam dựa trên những kết quả khả thi này.

2 Nội dung tổng quan

2.1 Khái niệm về tính, vị, và quy kinh

Mỗi vị thuốc sẽ tác động ưu thế ở tại một vị trí nhất định trong cơ thể. Theo YHCT, sự phân bố này phụ thuộc vào tính và vị của vị thuốc [2]. Thuốc YHCT gồm bốn tính cơ bản: lạnh (hàn), mát (lương), ấm (ôn), và nóng (nhiệt) [3]. Biểu đồ nhiệt (Hình 1) minh họa cho tính của vị thuốc từ lạnh đến nóng [3].



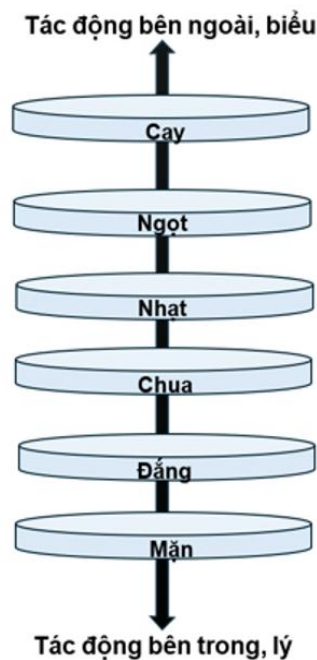
Hình 1 Biểu đồ nhiệt minh họa cho tính của vị thuốc

Vị dược phân loại gồm năm vị chính (ngũ vị): cay (tân), đắng (khô), chua (toan), mặn (đạm), và ngọt (cam). Ngoài ra còn có vị nhạt. Hình 2 cho thấy sự phân bố của vị thuốc trong cơ thể theo ngũ vị. Quy kinh của vị thuốc được thể hiện qua tác dụng của thuốc đạt hiệu quả tốt nhất tại các tạng, phủ, hoặc kinh, lạc cụ thể. Ngược lại, ở các vị trí khác, tác dụng của thuốc sẽ giảm đi [4].

2.2 Khái niệm về Dược lý học

Sự tương tác giữa thuốc và cơ thể con người bao gồm sự tác động, phản ứng của thuốc đối với cơ thể và ngược lại; là nội dung nghiên cứu của Dược lý học. Dược lý học là một chuyên ngành đa lĩnh vực gồm dược động học, dược lực học, dược lâm sàng, dược lý học hệ thống. Mục đích của Dược lý học là nhằm tối ưu hóa việc sử dụng thuốc, đảm bảo sự an toàn cho người bệnh, đồng thời nâng cao hiệu quả điều trị của thuốc [5] (Hình 2).

Như vậy, về bản chất và mục đích, Dược lý học YHHĐ và sự tác động của thuốc YHCT đến cơ thể là có sự tương quan. Hiểu rõ dược tính, vị, quy kinh (TVQK) của từng vị thuốc sẽ giúp ích cho việc chọn lựa vị thuốc phù hợp, tác động đến vùng, bộ phận và tạng phủ tương ứng, từ đó nâng cao hiệu quả điều trị và đảm bảo an toàn cho người bệnh. Do đó, việc ứng dụng các phương pháp nghiên cứu Dược lý học để làm sáng tỏ thuộc tính của thuốc YHCT là hoàn toàn hợp lý và có triển vọng.



Hình 2 Vị trí tác động chính của ngũ vị trong cơ thể [4]

2.3 Các phương pháp dược lý hiện đại được ứng dụng để nghiên cứu TVQK

2.3.1 Mô hình chuột mô phỏng chứng bệnh YHCT

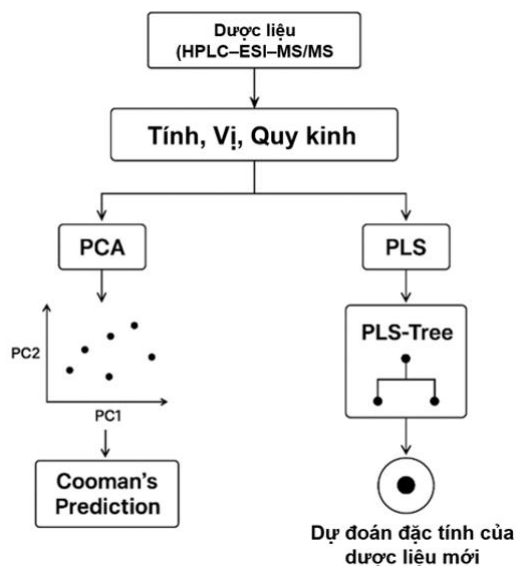
Các mô hình động vật đóng vai trò quan trọng trong nghiên cứu YHCT, thu hẹp khoảng cách giữa các phương pháp thực hành cổ xưa và phương pháp khoa học hiện đại. Mô hình mô phỏng được các hội chứng YHCT sẽ tạo điều kiện thuận lợi cho nghiên cứu bệnh lý và tìm hiểu về đáp ứng điều trị [6]. Một nghiên cứu

gần đây đã xây dựng mô hình chuột có biểu hiện Phế âm hư để đánh giá hiệu quả điều trị của dịch chiết từ ba vị thuốc bạc hà, cúc hoa và tiền hồ [7]. Cả ba vị thuốc đều có vị cay, tính mát và quy kinh Phế, do đó, được chọn lựa làm vị thuốc "ứng viên". Mô hình được xây dựng bằng cách cho chuột uống viên giáp trạng Thyroid và hít khói thuốc mỗi ngày. Dịch chiết dược liệu được cho uống trong vòng hai tuần. Theo YHCT, khi Phế âm không đủ, hư nhiệt bốc lên gây ngũ tâm phiền nhiệt, gò má đỏ, dịch chiết ba vị thuốc này làm giảm nhiệt độ trực tràng ở chuột, gợi ý rằng do tính mát của dược liệu có tác dụng thanh nhiệt tả hỏa, giáng nội nhiệt, cải thiện chứng hư nhiệt nội bốc. Tương tự, một nhóm nghiên cứu cũng dùng mô hình chuột Phế dương hư để đánh giá vị cay, tính ấm và quy kinh Phế của ba vị thuốc sa nhân, tử tô diệp và bạch chi [8].

Như vậy, mô hình thực nghiệm trong YHCT thường được ứng dụng để đánh giá hiệu quả cải thiện triệu chứng của bài thuốc hoặc tác dụng sinh học của hoạt chất trong dược liệu, cũng như nhằm tạo một điều kiện mô phỏng bệnh lý tương ứng trên con người giúp đánh giá hiệu quả của vị thuốc đã biết trước thuộc tính. Tuy nhiên, mặt hạn chế của phương pháp này là vẫn chưa làm rõ được cơ chế cụ thể mà vị thuốc đã tác động.

2.3.2 Phân tích thành tố chính, hồi quy bình phương tối thiểu từng phần và phương pháp dự đoán Cooman
Phân tích thành tố chính (Principal Component Analysis – PCA) là phương pháp giảm chiều dữ liệu để tóm tắt các đặc điểm chính trong bộ dữ liệu phức tạp, với mục đích xác định sự tương đồng và khác biệt giữa các mẫu [9]. Hồi quy bình phương tối thiểu từng phần (Partial Least Squares Regression – PLS) là phương pháp hồi quy đa biến dùng để xác định mối quan hệ giữa hai tập biến: ma trận dữ liệu độc lập như TPHH và ma trận dữ liệu phụ thuộc như TVQK. Ngoài việc giảm chiều dữ liệu như PCA, PLS còn đánh giá mối tương quan giữa hai nhóm dữ liệu, do đó, giúp xây dựng mối liên hệ giữa các hợp chất, cấu trúc hóa học với thuộc tính của dược liệu [10]. Biểu thể của PLS là cây PLS, được trình bày dưới dạng cây phân loại (tree model) minh họa sự tương đồng và khác biệt theo cấu trúc phân tầng. Các mẫu có đặc điểm hóa học và dược lý giống nhau sẽ phân bố gần nhau trên cây PLS. Dự đoán

Cooman (Cooman's prediction) là phương pháp giúp đánh giá sự tương đồng và khác biệt sau khi phân tích PCA hoặc PLS. Đồ thị Cooman sẽ biểu diễn khoảng cách giữa các mẫu so với hai mô hình của PCA và PLS, mỗi điểm trên đồ thị thể hiện vị trí của mẫu so với hai nhóm tham chiếu [11].



Hình 3 Sơ đồ ứng dụng PCA, PLS và dự đoán Cooman cho nghiên cứu thuộc tính của thuốc YHCT

Hình 3 minh họa sơ đồ ứng dụng PCA, PLS và dự đoán Cooman cho nghiên cứu thuộc tính của thuốc YHCT. Phương pháp này tận dụng nhiều kỹ thuật phân tích đa biến bao gồm tối ưu hóa bề mặt đáp ứng và phép chiếu lên các cấu trúc tiềm ẩn nhằm nâng cao độ chính xác của mô hình dự đoán mối liên hệ.

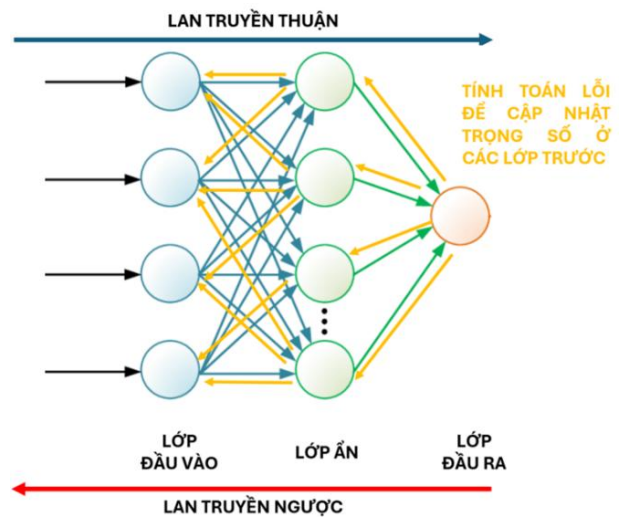
Theo kết quả của một nghiên cứu đã ứng dụng phân tích định tính – định lượng các hợp chất, sắc ký lỏng hiệu năng cao kết hợp khối phổ hai lần (HPLC-ESI-MS/MS) để phân tích thành phần hợp chất trong Thái Bạch Mỹ Hoa Thảo (*Callianthemum taipaicum*). Sau đó, dựa trên phân tích sự tương đồng và khác biệt giữa dược liệu này với 12 nhóm dược liệu đối chứng, nhóm đã sử dụng PCA để xác định các hợp chất hoặc chất chuyển hóa khác biệt giữa các nhóm mẫu. Các hợp chất này được gọi là “differential compounds”, là những hợp chất tạo ra sự khác biệt có ý nghĩa sinh học hoặc dược lý. Kết quả cho thấy 55 hợp chất được định lượng chính xác, có tuyến tính tốt. Phương pháp PLS, cây PLS và phương pháp dự đoán Cooman đã xác định rằng *C. taipaicum* có mẫu hóa học riêng biệt, gần với

nhóm thuốc quy kinh Phế và Bàng quang với vị cay tính ấm [11].

Về mặt hạn chế, PCA khó xác định được thành tố nào là chính, đặc biệt đối với những bộ dữ liệu lớn. Ngoài ra, PCA thường bị ảnh hưởng bởi các biến số đầu vào, vì thế ảnh hưởng đến việc xác định vai trò của từng thành tố [12]. Như vậy, với số lượng các TPHH lớn của nhiều vị thuốc sẽ ảnh hưởng đáng kể đến kết quả cuối cùng. Tương tự, hiệu suất của PLS có thể bị ảnh hưởng bởi việc lựa chọn các thành phần và bản chất của dữ liệu được phân tích [13]. Các vị thuốc YHCT vốn dĩ phức tạp, chứa vô số hợp chất tự nhiên có thể biểu hiện các tương tác hiệp đồng hoặc đối kháng. Sự phức tạp này gây khó khăn cho việc mô tả chính xác chất lượng và hoạt tính sinh học của các sản phẩm thảo dược bằng PCA hoặc PLS. Ngoài ra, việc thiếu các quy trình chuẩn hóa cho việc kiểm soát chất lượng và định danh trở thành một thách thức cho sự triển khai PCA và PLS [11]. Tương tự, độ chính xác dự đoán của phương pháp Cooman có thể bị ảnh hưởng bởi tính khả dụng và chất lượng của dữ liệu được sử dụng để phát triển mô hình.

2.3.3 Mạng nơ-ron lan truyền ngược kết hợp khai thác dữ liệu

Trong nghiên cứu thuốc YHCT, mô hình mạng nơ-ron lan truyền ngược (Backpropagation Neural Network – BPNN) đã chứng minh độ chính xác đáng kể trong việc dự đoán các thông số dược động học. BPNN là một loại mạng nơ-ron truyền thẳng nhiều lớp được huấn luyện dựa trên thuật toán lan truyền ngược sai số và hiện là một trong những mô hình mạng nơ-ron được ứng dụng rộng rãi nhất hiện nay [14]. BPNN chủ yếu bao gồm ba tầng: tầng đầu vào (input layer), tầng ẩn (hidden layer) và tầng đầu ra (output layer). Quá trình huấn luyện mạng BP gồm hai bước chính: lan truyền thuận giúp tính toán đầu ra của từng lớp dựa trên giá trị hiện tại của các tham số và lan truyền ngược tính toán sai số giữa đầu ra thực tế và đầu ra kỳ vọng, từ đó cập nhật trọng số của từng lớp thông qua đạo hàm riêng của hàm mất mát (loss function) đối với các tham số mạng. Hai bước này được lặp lại liên tục cho đến khi mạng hội tụ (Hình 4) [15].



Hình 4 Cấu trúc BPNN

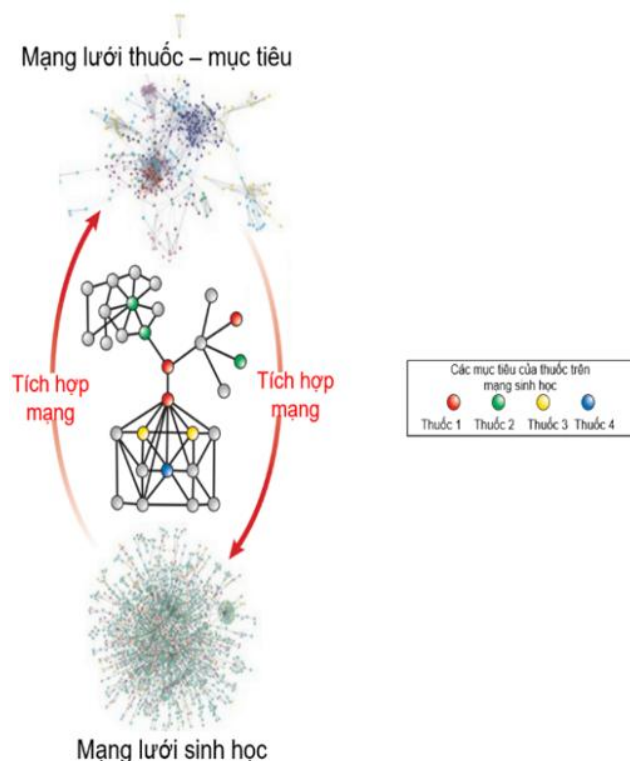
Khai thác dữ liệu (data mining) đặc biệt có ý nghĩa trong nghiên cứu YHCT, phương pháp kết hợp tri thức kinh nghiệm truyền thống với các kỹ thuật phân tích hiện đại giúp nâng cao hiểu biết về đặc tính dược liệu và tác dụng trị liệu [16]. Khai thác dữ liệu bao gồm nhiều kỹ thuật khác nhau nhằm trích xuất thông tin có giá trị từ các tập dữ liệu lớn: luật kết hợp (Association Rules) tập trung vào phát hiện mối quan hệ giữa các biến trong một tập dữ liệu. Thuật toán Apriori là thường được sử dụng trong kỹ thuật này [17]. Cây quyết định (Decision Trees) được sử dụng để phân loại dữ liệu hoặc dự đoán kết quả dựa trên một chuỗi tiêu chí. Trong YHCT, cây quyết định có thể được dùng để hướng dẫn thầy thuốc lựa chọn phác đồ điều trị phù hợp dựa trên dữ liệu cụ thể của bệnh nhân [16].

BPNN và phương pháp khai thác dữ liệu đã được vận dụng để xác định thuộc tính của các vị thuốc bổ hư là tính âm, vị ngọt và quy kinh vào Tỳ, Thận và Tâm từ 76 vị thuốc ban đầu được đưa vào để xây dựng mô hình [15]. Dựa trên tứ tính, ngũ vị và quy kinh của dược liệu, 22 tham số được lựa chọn làm dữ liệu đầu vào của mạng. Bốn chức năng bổ chính của thuốc được chọn là dữ liệu đầu ra gồm: bổ khí, bổ dương, bổ huyết và bổ âm.

Tác dụng hiệp đồng và sự đa dạng TPHH trong các vị thuốc, bài thuốc đã làm phức tạp việc phân lập cũng như việc hiểu rõ các cơ chế hoạt động của từng thành phần [18]. Do đó, việc nâng cao hiệu quả và độ tin cậy

của các mô hình BPNN trong nghiên cứu thuốc YHCT đóng vai trò then chốt.

2.3.4 Dược lý mạng



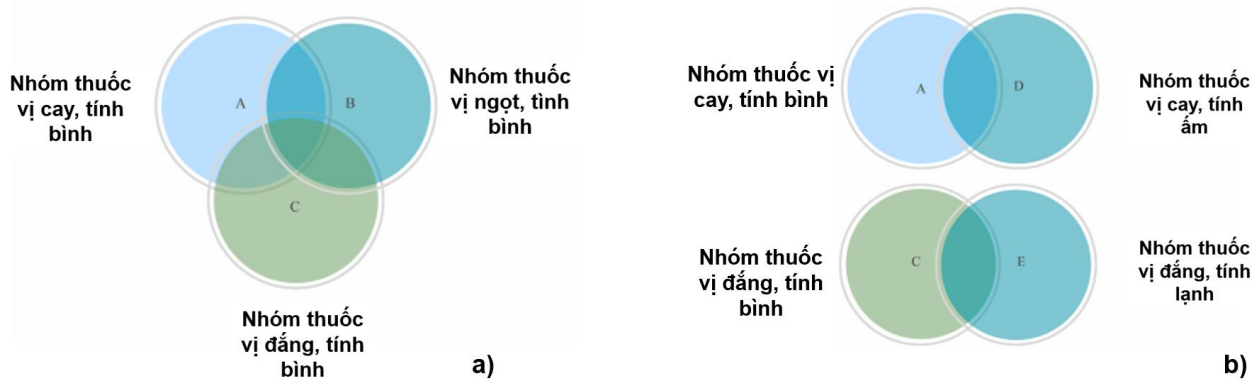
Hình 5 Cấu trúc BPNN

Dược lý mạng được giới thiệu bởi Andrew L Hopkins (2007) [19], là một phương pháp sử dụng mô hình máy tính kết hợp phân tích các dữ liệu có được từ các thí nghiệm tiến hành trên các đa phân tử sinh học trên tế bào và mô hình động vật [20]. Các thông tin được sử dụng làm cơ sở xây dựng dược lý mạng bao gồm cấu trúc mạng lưới, so sánh và xây dựng mạng lưới ngẫu nhiên, mạng lưới phân tầng và cụm giữa thuốc – mục tiêu, và/hoặc mục tiêu – bệnh, cuối cùng xây dựng được mạng lưới đa tầng thuốc – mục tiêu – bệnh – cơ chế hoặc con đường sinh học. Hình 5 minh họa dược lý mạng được xây dựng dựa trên sự “ánh xạ” (mapping) hay gắn giữa mạng lưới sinh học và mạng lưới thuốc – mục tiêu. Chính vì mục tiêu là tìm được các mục tiêu thuốc mới và các cơ chế phân tử liên quan, dược lý

mạng được ứng dụng mạnh mẽ trong nghiên cứu thuốc YHCT, giúp xác định được thành phần hoạt chất trong từng dược liệu, bài thuốc, giúp dự đoán được đích điều trị và cơ chế phân tử.

Nguyên lý chính của dược lý mạng là phân tích mạng lưới của hệ thống sinh học và chọn lựa các tín hiệu đặc trưng để xây dựng mạng lưới thuốc – mục tiêu, với mô hình đa mục tiêu – đa thành phần (hoạt chất), khác hoàn toàn so với mô hình trước đây là một thuốc – một mục tiêu – một bệnh [21]. Trong mạng lưới của dược lý mạng, các nút đại diện cho hợp chất sinh học, TPHH, hoặc cũng có thể mục tiêu tác động, hoặc bệnh, tùy thuộc vào kiểu mạng lưới được xây dựng. Ngược lại, các cạnh tương trưng cho mối liên hệ giữa các nút. Phân tích mạng lưới bao gồm phân tích cấu trúc và chức năng của mạng lưới. Khi các cụm chức năng được xác định, vai trò của cụm sẽ tiếp tục được phân tích con đường tín hiệu hoặc quá trình sinh học mà thành phần hợp chất trong thuốc YHCT sử dụng nhằm mục tiêu điều trị, cụ thể là phân tích làm giàu GO hoặc KEGG. Kết quả xác định được nhóm gen nào sẽ tham gia vào con đường nào, từ đó thiết lập cơ chế phân tử mà vị thuốc có khả năng đã tác động đến. STRING hay BATMAN 2.0 có thể giúp trích xuất phân tích làm giàu [21, 22].

Dược lý mạng trong nghiên cứu thuốc tính của thuốc YHCT đã được ứng dụng cho các nhóm vị thuốc có tính vị lần lượt ngọt – bình, đắng – bình, cay – bình, cùng hai nhóm vị thuốc cay – ấm và đắng – lạnh [24]. Vì tính “bình” sẽ không làm thay đổi tính chất của bệnh theo hướng Hàn hay Nhiệt, do đó, tác động của thuốc sẽ đặc trưng cho Vị của vị thuốc đó. Hiểu rõ được tính chất này, nhóm tác giả đã sàng lọc và tích hợp các mục tiêu đích của ba nhóm dược liệu: ngọt – bình, đắng – bình, cay – bình. Những mục tiêu chung sẽ được loại bỏ, các mục tiêu còn lại là đặc hiệu cho Vị của từng nhóm thuốc (Hình 6a). Tương tự, nhóm tác giả tích hợp các mục tiêu đích của cay – bình với cay – ấm, và đắng – bình với đắng – lạnh. Mục tiêu không nằm trong phần chung sẽ đặc trưng cho tính của nhóm thuốc tương ứng (Hình 6b).



Hình 6 Xác định mục tiêu đích đặc trưng cho tính, vị của nhóm thuốc nghiên cứu

Các bài thuốc YHCT thường chứa rất nhiều thành phần hoạt chất và một số chất có thể bị biến đổi trong quá trình sắc thuốc dưới tác động của nhiệt độ, thời gian sắc, vì vậy tác dụng tổng thể của bài thuốc không thể được hiểu đơn giản là tổng hợp tác dụng của từng hợp chất riêng lẻ. Hàm lượng tương đối của các hợp chất trong dược liệu rất khác nhau, đặc biệt, một số chất khó đạt được nồng độ hiệu quả trong cơ thể người, nhưng lại không thể loại trừ khi phân tích bằng dược lý mạng. Độ tin cậy của việc sàng lọc dựa trên các thông số về phân bố, hấp thu, chuyển hóa và thải trừ, vẫn còn gây tranh cãi. Đây chính là những nhược điểm mà dược lý mạng còn tồn tại [24].

Mặc dù gợi ý được cơ chế phân tử mà thuốc YHCT có thể sử dụng, kết quả của dược lý mạng vẫn cần phải được thẩm định lại bằng thí nghiệm in vitro và in vivo.

2.4 Khuyến nghị định hướng nghiên cứu trong tương lai

Dựa trên những phân tích thuận lợi và hạn chế của các phương pháp Dược lý học cùng với kết quả của các nghiên cứu đại diện, đã cho thấy tiềm năng ứng dụng của các phương pháp này vào nghiên cứu TVQK của thuốc YHCT. Với mục tiêu phân tích và hiểu rõ bản chất cơ chế phân tử của thuốc YHCT, một phương pháp đơn lẻ không thể nào tối ưu hóa được kết quả mà cần có sự kết hợp giữa các kỹ thuật, phương thức với nhau. Ngoài ra, cần chú ý sự chuẩn hóa của các cơ sở dữ liệu (CSDL) nhằm hạn chế sự không đồng nhất về mặt TPHH của các dược liệu.

CSDL về TPHH các cây thuốc tại Việt Nam còn chưa đa dạng và phong phú so với các nước có YHCT. Các

hợp chất trong cây thuốc hoàn toàn có thể thay đổi dưới sự tác động của thổ nhưỡng, khí hậu của vùng, địa phương nuôi trồng. Ngoài ra, hàm lượng, liều dùng của vị thuốc cũng sẽ tác động đến hiệu quả điều trị, không đơn thuần chỉ là sự hiện diện của vị thuốc đó. Tuy nhiên, đa phần các cây thuốc sử dụng tại Việt Nam phần lớn đều được sử dụng tương đồng với các CSDL được sử dụng trong các nghiên cứu trình bày trong bài tổng quan này. Vì vậy, đó sẽ là một nguồn tham khảo hữu ích để tiến hành các bước tương tự cho các nghiên cứu tương tự. Như đã phân tích ở trên, việc xây dựng CSDL là hết sức cần thiết, do vậy, để chuẩn hóa thành phần hóa học của các dược liệu thì Dược điển Việt Nam VI của Bộ Y tế và bộ tài liệu do Tổ chức Y tế Thế giới (WHO) biên soạn, cung cấp thông tin tiêu chuẩn hóa về chất lượng, an toàn và hiệu quả của dược liệu có thể được dùng làm tiêu chuẩn thống nhất. Đối với tên hợp chất, cấu trúc, mã ID của dược liệu có thể dùng Pubchem hoặc ChEMBL để chuẩn hóa. Hiện nay, YHCT tại Việt Nam ngày càng được sự quan tâm lớn, các bệnh viện đa khoa đều có khoa YHCT, phản ánh qua nhu cầu đào tạo về bác sĩ YHCT ngày càng tăng [25]. Đội ngũ bác sĩ YHCT tại các bệnh viện có đủ chuyên môn cần thiết trong chẩn đoán và điều trị bệnh [25]. Như vậy, chắc chắn rằng dữ liệu về sự kết hợp các bài thuốc, vị thuốc ở mỗi toa thuốc mà bác sĩ chỉ định cho mỗi một bệnh lý rất đa dạng và phong phú, việc ứng dụng các phương pháp tiềm năng được giới thiệu trong bài lại chưa nhiều. Nói một cách khác, các nhà nghiên cứu, bác sĩ lâm sàng và các chuyên gia sức khỏe có thể tận dụng nguồn tài nguyên sẵn có này để đẩy

mạnh nghiên cứu thuốc YHCT. Đặc biệt, để đạt kết quả trong nghiên cứu tốt, phản ánh gần đúng nhất với thực tế cần phải có sự kết hợp đa chuyên ngành với sự tham gia của các chuyên gia về khoa học máy tính, dược học và y học, cũng như các nhà nghiên cứu am hiểu về xây dựng các thí nghiệm và mô hình động vật tương ứng.

3 Kết luận

Các phương pháp nghiên cứu Dược lý học như dược lý mạng, mô hình động vật kết hợp các thuật toán hiện đại như PCA, PLS hay phương pháp dự đoán Cooman, và

mới nhất là BPNN có tầm quan trọng và hiệu quả trong việc xác định TVQK của thuốc YHCT. Phần nào đó cũng giúp đưa ra những con đường, cơ chế sinh học mà thuốc YHCT có khả năng sử dụng để có được tác dụng điều trị. Tuy nhiên, cần có sự thẩm định lại bằng thí nghiệm, thử nghiệm trên động vật và trên hết là thử nghiệm lâm sàng trên người bệnh. Việc tiến hành nghiên cứu không những đòi hỏi kiến thức chuyên môn và cần có kinh nghiệm về thao tác kỹ thuật, do đó, sẽ rất quan trọng nếu có sự kết hợp các chuyên gia từ các lĩnh vực liên quan.

Tài liệu tham khảo

1. Zhang, K., Yan, G., Zhang, A., Sun, H., & Wang, X. (2017). Recent advances in pharmacokinetics approach for herbal medicine. *Rsc Advances* 7, 28876.
2. Shao, L., & Zhang, B. (2013). Traditional Chinese medicine network pharmacology: theory, methodology and application. *Chinese Journal of Natural Medicines* 11, 110.
3. Hempen, C.-H., & Fischer, T. (2009). *A materia medica for Chinese medicine: plants, minerals, and animal products*. Elsevier Health Sciences.
4. Chang, Z., Jia, D., & Bare, J. (2015). *Chinese materia medica*. PMPH-USA.
5. Khonsary, S. A. (2023). Goodman and Gilman's the pharmacological basis of therapeutics. *Surgical Neurology International*, 14, 91.
6. Zhao, M., Che, Y., Gao, Y., & Zhang, X. (2024). Application of multi-omics in the study of traditional Chinese medicine. *Frontiers in Pharmacology*, 15, 1431862.
7. Fang, H., Lü, G. Y., Chen, S. H., Su, J., Mou, X. H., & Huang, M. C. (2011). Effects of three pungent-cool herbs with lung meridian tropism on a mouse model of lung Yin deficiency. *Asia-Pacific Traditional Medicine*, 7, 11.
8. Chen, S., Lv, G., Huang, M., Su, J., Fang, H., & Mou, X. (2011). Effects of three traditional Chinese medicine with pungent-flavor, warm-nature and meridian tropism in lung on lung-yang deficiency rats induced by compound factors. *Zhongguo Zhong Yao Za Zhi* 36, 1512. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22779189>.
9. Abraham, E. J., & Kellogg, J. J. (2021). Chemometric-Guided Approaches for Profiling and Authenticating Botanical Materials. *Front Nutr*, 8, 780228. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.780228>.
10. Liu, Y.-R., Tang, Z.-S., Duan, J.-A., Sun, X.-C., Song, Z.-X., Shi, X.-B., Lv, Y., Zhang, Z., & Qian, D.-W. (2018). Flavor and meridian tropism classification analysis of *Callianthemum taipaicum*. *Zhongguo Zhong Yao Za Zhi* = *Zhongguo Zhongyao Zazhi* = *China Journal of Chinese Materia Medica* 43, 353.
11. Twin, A. (2024). What is data mining? How it works, benefits, techniques, and examples. *Investopedia*. (Aug. 2, 2022), [Online]. Available: <https://www.investopedia.com/terms/d/datamining.asp> (visited on 03/30/2023).
12. Wiklund, S. (2008). *Multivariate data analysis for Omics*. Umea: Umetrics, p. 108-109.
13. Chao, Y.-S., Wu, H.-C., Wu, C.-J., & Chen, W.-C. (2018). Principal component approximation and interpretation in health survey and biobank data. *Frontiers in Digital Humanities* 5, 11.



14. Weeraratne, N., Hunt, L., & Kurz, J. (2025). Optimizing PCA for Health and Care Research: A Reliable Approach to Component Selection. *arXiv preprint arXiv:2503.24248*.
15. Wang, Z. G. (2011). Modern research on the theory of medicinal properties of traditional Chinese medicine: Issues, approaches, and methods. *Journal of Shandong University of Traditional Chinese Medicine* 35, 195.
16. Liu, L. P., Zhang, X. Y., Guo, Y. K., & Niu, X. L. (2019). Study on the relationship between traditional Chinese medicine properties (nature, flavor, and meridian tropism) and the efficacy of tonifying deficiency herbs based on a BP neural network. *Software Guide* 18, 6.
17. Yang, J., Wang, Q., Zhou, S., Zhang, F., & Lv, Z. (2023). Construction of Chinese Medicine Prescription Data Mining Based on Association Rules of the System. *Exploratory Research and Hypothesis in Medicine*, 8(4), 307-318.
18. Song, Z., Chen, G., & Chen, C. Y.-C. (2024). AI empowering traditional Chinese medicine? *Chemical Science* 15, 16844.
19. Hopkins, A. L. (2007). Network pharmacology. *Nat Biotechnol* 25, 1110. <https://doi.org/10.1038/nbt1007-1110>
20. Zhao, L., Zhang, H., Li, N., Chen, J., Xu, H., Wang, Y., & Liang, Q. (2023). Network pharmacology, a promising approach to reveal the pharmacology mechanism of Chinese medicine formula. *Journal of Ethnopharmacology*, 309, 116306.
21. Szklarczyk, D., Kirsch, R., Koutrouli, M., Nastou, K., Mehryary, F., Hachilif, R., Gable, A. L., Fang, T., Doncheva, N. T., Pyysalo, S., Bork, P., Jensen, L. J., & von Mering, C. (2023). The STRING database in 2023: protein-protein association networks and functional enrichment analyses for any sequenced genome of interest. *Nucleic Acids Research* 51, 638. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac1000>.
22. Kong, X., Liu, C., Zhang, Z., Cheng, M., Mei, Z., Li, X., Liu, P., Diao, L., Ma, Y., Jiang, P., Kong, X., Nie, S., Guo, Y., Wang, Z., Zhang, X., Wang, Y., Tang, L., Guo, S., Liu, Z., & Li, D. (2024). BATMAN-TCM 2.0: an enhanced integrative database for known and predicted interactions between traditional Chinese medicine ingredients and target proteins. *Nucleic Acids Research*, 52(D1), D1110-D1120. <https://doi.org/10.1093/nar/gkad926>.
23. Wang, H., Wei, W., Liu, J., Zhang, S., Zhao, Y., & Yu, Z. (2024). The characterization of traditional Chinese medicine natures and flavors using network pharmacology integrated strategy. *Journal of Traditional and Complementary Medicine* 14, 343. <https://doi.org/10.1016/j.jtcme.2023.12.004>.
24. Jiashuo, W. U., Fangqing, Z., Zhuangzhuang, L. I., Weiyi, J., & Yue, S. (2022). Integration strategy of network pharmacology in Traditional Chinese Medicine: a narrative review. *Journal of Traditional Chinese Medicine* 42(3), 479. <https://doi.org/10.19852/j.cnki.jtcm.20220408.003>.
25. Phạm Tiến Thành, Trần Thị Hải Vân, & Đỗ Thị Thanh Toàn. (2024). Thực trạng và nhu cầu đào tạo liên tục về y học cổ truyền của bác sĩ tại các bệnh viện đa khoa ở Hà Nội năm 2022. *Tạp chí Y học Việt Nam*, 535(2).

Overview of Modern Pharmacology Approaches in Studying the Natures, Flavors, and Meridian Tropism of Traditional Medicinal Material

Huynh Thi Luu Kim Huong^{1,*}, Vo Thanh Hoa^{2,3}

¹Department of Pharmacy, Nguyen Tat Thanh University, Ho Chi Minh City, Viet Nam

²Research Center for Discovery and Development of Healthcare Products, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Ho Chi Minh City, Viet Nam

³University of Health Sciences, Vietnam National University-Ho Chi Minh City, Ho Chi Minh City, Viet Nam

*htlkhuong@ntt.edu.vn, vthoa@uhsvnu.edu.vn

Abstract Nature, Flavour, and Meridian tropism are key factors in choosing suitable materials and combining different materials to achieve the most therapeutic efficacy. The application of novel pharmacological approaches to Nature, Flavour, and Meridian tropism of medicinal materials is currently limited. Therefore, to provide a comprehensive overview of new pharmacological methods, their advantages and disadvantages, this study curated recent studies using those approaches from 2015-2025 to analyze the range of applications, pros and cons, and the factors affecting them. The results have shown that these pharmacological methods have significantly contributed to translating the fundamental use of traditional medicinal herbs' applications for protecting human health from empirical, experience-based practices to a scientific basis, particularly through network pharmacology and backpropagation neural networks. This study would serve as a reference to help scientists select appropriate methodologies for research on traditional medicinal herbs and support physicians in prescribing traditional medicinal materials.

Keywords Traditional medicinal material; natures and flavors; meridian tropism; backpropagation neural networks; network pharmacology.